

## 关于“智能化工”背景下物理化学教学改革的思考

叶同奇\*, 王琪, 叶跃雯, 王艳青, 周红洋, 孔祥华

合肥工业大学化学与化工学院, 合肥 230029

**摘要:** 在当前“智能化工”迅速发展的大背景下, 作为化工专业的核心课程之一, 物理化学的教学不仅要因应智能化工的发展对化工专业人才的知识和能力需求, 同时也应积极探索教学方法和手段的创新, 吸收智能化工发展的最新技术成果并应用于教学过程中。通过对课程体系内容的进一步优化、引入先进的计算机辅助教学以及模拟实验手段等, 提升教学效果, 增强学生的实践能力和创新意识, 培养他们适应智能化工发展的能力。

**关键词:** 智能化工; 物理化学; 教学改革

**中图分类号:** G64; O6

## Reflection on the Reform of Physical Chemistry Teaching under the Background of “Intelligent Chemical Engineering”

Tongqi Ye\*, Qi Wang, Yuewen Ye, Yanqing Wang, Hongyang Zhou, Xianghua Kong

School of Chemistry and Chemical Engineering, Hefei University of Technology, Hefei 230029, China.

**Abstract:** In the current context of rapid development of “Intelligent Chemical Engineering”, as one of the core courses of chemical engineering, the teaching of physical chemistry should not only respond to the knowledge and skill requirements of chemical engineering professionals in the field of intelligent chemical engineering, but also actively explore innovative teaching methods and approaches, incorporating the latest technological achievements of intelligent chemical engineering into the teaching process. By further optimizing the content of the curriculum and introducing advanced computer-aided teaching and simulation experiments, the teaching effectiveness can be enhanced, and students' practical abilities and innovative awareness can be strengthened, thus cultivating their ability to adapt to the development of intelligent chemical engineering.

**Key Words:** Intelligent chemical engineering; Physical chemistry; Teaching reform

自从德国在2011年汉诺威工业博览会上提出了“工业4.0”后, “智能制造”的概念逐渐风靡全球, 中国也很早就意识到人工智能和大数据的重要性而将其作为我国的国家战略。在这一背景下, “智能化工”也应运而生。“智能化工”是指在化工行业中广泛应用先进的信息技术、自动化技术和人工智能等技术手段, 实现生产过程的智能化、数字化和自动化。在2015年中国工业和信息化部启动的207个智能制造试点示范项目中, 有18个属于化工行业<sup>[1]</sup>。以物联网、云计算、大数据和深度学习等为代表的信息科技革命为化工产业的转型升级带来了难得的机遇。今年初OpenAI公司发布的大语言模型ChatGPT再次将全球的人工智能研究推向了一个新的高潮, 大语言模型在各个专业领域的应用也被寄予了厚望。总而言之, 智能技术已成为各产业领域竞争的新焦点和引领未来的战略性技

收稿: 2023-08-31; 录用: 2023-10-20; 网络发表: 2023-11-14

\*通讯作者, Email: yetq@hfut.edu.cn

基金资助: 创新创业教育精品课程(KCCX2207); 新建专业质量提升项目(2022xjzts032); 青年教师教学研究项目(JYQN2207)

术, 中国石化、中国石油等化工行业龙头企业均提出了化工行业发展工业互联网及智能制造的技术架构和建设路径<sup>[2]</sup>。与此同时, 在高等学校, “智能化工”作为一门涉及化工技术和人工智能的新兴交叉学科, 也引起了人们越来越多的关注, 四川大学、合肥工业大学、武汉工程大学等一批高校先后启动了相应的学科建设计划, 以应对智能化工的发展对相关专业人才的需求。

## 1 “智能化工”对本科教学提出的新挑战

根据工业和信息化部等六部门发布的《关于“十四五”推动石化化工行业高质量发展的指导意见》, “十四五”期间要建成30个左右智能制造示范工厂和50家左右的智慧化工示范园区。通过智慧化工园区的建设, 以大数据、物联网和5G通信技术为支撑, 实现横向的化工园区互联和纵向的产业集群互通, 构建完备的供应链网络和协同制造能力, 实现对客户需求的快速响应, 并加快新产品的研发和生产速度。由此可见, 智能技术正在迅速地渗透到包括分子、单元、过程、工厂和产业链等化学化工研究和应用领域的各个尺度, 包括各尺度间的互联、耦合与传递机制也已成为科学研究与工程技术应用的热点<sup>[3]</sup>。因此, 以大数据和人工智能为代表的“智能化工”将在研发、生产、经营和销售等各个环节发挥巨大的作用。以研发环节为例, 在Web of knowledge上, 分别用“chemistry + neural network”和“chemistry + artificial intelligence”作为关键词搜索, 得到如图1所示的每年发表的研究论文数。可以看出进入21世纪以来, 人工智能技术在化学化工领域的应用呈现快速增长的趋势, 尤其是近两年呈几何级数增长, 当然也是得益于近几年计算机软硬件技术的飞速发展, 特别是GPU计算能力的提升使得机器学习工具普及化。神经网络、支持向量机等人工智能手段已经成功地运用于建模和预测各种反应的催化性能, 如甲醇合成、烷烃异构化和烯烃环氧化等<sup>[4]</sup>。陶氏将高性能计算与高通量实验相结合, 将实验效率提高了10–100倍, 为客户提供定制产品的速度也提高了2–3倍<sup>[5]</sup>。燕山石化在溶剂回收流程中依靠过程模拟对精馏系统进行强化, 通过优化操作参数和缩短分离流程, 使得蒸汽消耗降低32.5%, 提升经济效益1400万元/年。京博石化为丁基橡胶装置建立全局优化的动态模型, 通过数据驱动的智能模型实现工艺操作的快速响应和实时优化, 预期实现经济效益200万元/年。

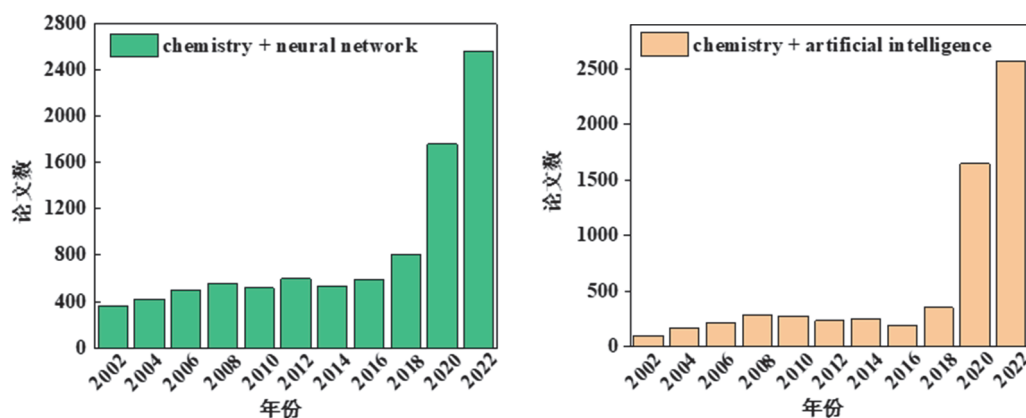


图1 神经网络(左)和人工智能(右)技术在化学领域中应用的增长趋势

众所周知, 在计算机模拟方面, 量子化学计算和化工模拟已经分别在分子尺度和过程尺度取得了很大的成功, 而最近出现的计算机辅助材料与过程设计(CAMPD)还实现了分子尺度和过程尺度之间的耦合和联合优化, 以CO<sub>2</sub>捕集为例, 从捕集材料的结构、组成到热力学性质再到宏观的塔尺寸和操作条件等, 都会影响到CO<sub>2</sub>的捕集效能<sup>[3]</sup>, 而无论是针对捕集材料结构性质的量子化学计算还是针对捕集工艺的化工过程模拟都只能得到局部最优解, 只有当它们同时作为变量进行优化时, 才有可能获得全局最优解, 即操作参数与材料结构性能相匹配的最佳材料和工艺。

鉴于以上事实，我们不难理解美国普渡大学教授Arvind Varma提出的观点，即在未来的化工领域中，除了传统的化工核心课程以外，分析、建模、仿真、过程控制类课程的重要性也越来越高<sup>[6]</sup>。单纯的化工或过程控制课程体系无法培养出适合智能化工发展的复合型人才。2018年由教育部、工业和信息化部、中国工程院共同发布的《关于加快建设发展新工科实施卓越工程师教育培养计划2.0的意见》中特别强调了以“信息+”为特色的“多学科交叉融合”是教学改革以及新工科建设的重要路径。“智能化工”课程体系的构建更重要的是要将化学化工知识和计算机信息技术进行有机的结合，而不只是把多个学科的课程进行简单的相加，如在分析化学课程中需要增加模式识别的教学内容，在数学课程中增加离散数学基础，在计算机基础课程中要增加Python编程语言的教学等。因此学科建设需要从顶层设计开始，对培养方案、课程规划、学科融合和实习实训等进行全面的整合，从而培养出适应“智能化工”发展的化工类专业人才。

## 2 顺势而为的物理化学教学改革

物理化学是化学化工、材料、制药、食品科学和环境工程等专业的必修课，是衔接基础化学和专业化学课的纽带。在四大基础化学中，物理化学有其特殊的地位，因为其他的化学学科都是以解决具体问题为目标的，较少涉及化学本质的探讨，而物理化学则是研究化学变化的普遍规律以及研究物理化学现象与物质本性之间关系的一门学科。鉴于物理化学在整个化学专业知识体系中的中心地位，“智能化工”的学科建设要求物理化学的教学也必须做出相应的调整和改革，以满足智能化工对专业人才的能力要求(图2)。

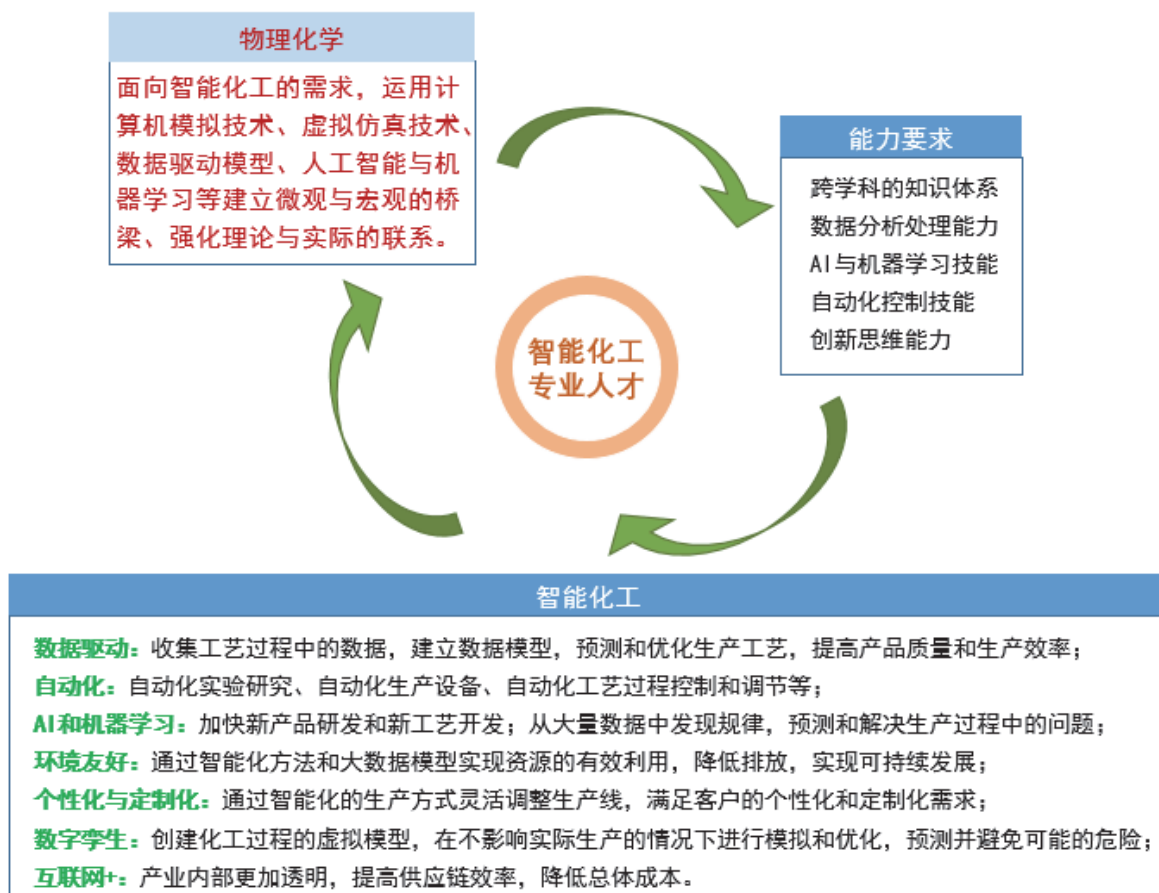


图2 智能化工的能力要求与物理化学的因应

在智能化工的大背景下，由大数据和人工智能所建立的数据模型正在驱动科研范式发生着深刻的变化，传统物理化学中基于严格公式推导的机理模型无论是对于宏观体系的模拟还是微观体系的精确描述都显得力不从心，而建立在大数据和机器学习基础上的数据模型则恰好可以弥补这一缺陷，大量研究表明基于材料基因库和机器学习的研究方法可以大大提升新材料的研发速度。以广泛使用的密度泛函理论计算软件VASP为例，在新发布的6.3版本中增加了机器学习力场，使得从头算分子动力学模拟的效率得到了数十倍的提升。由此带给我们的启发是，在以智能化工为背景的新的科研范式下，物理化学的教学更应注重让学生理解化学现象背后的物理图景，而非其公式描述，特别是对于以工程应用为主的工科专业。相应地，在考核方式上，也需要降低以公式运用和手工计算能力为考查目标的标准答案考试题的比例，而代之以更灵活的方式考查其思维能力和应用能力。

## 2.1 教学内容的加减法

在课时量不增加的情况下，如何适应“智能化工”的发展要求，是当前物理化学学科首先需要解决的问题。为此，我们需要做的是对教学内容做适当的加减法。比如热力学第一、第二定律和化学平衡等相关内容，学生在前置无机化学、大学物理等课程中已有涉及，因此可以少讲或略讲。特别是对于化工类专业，其目的是培养工程技术方面的专家，对化学基本理论的学习更应以侧重于其在实际化学反应过程中的应用为原则，因而在繁琐的公式推导和证明方面，可以适当地减少学时和降低要求。

在教学内容方面做减法的同时，还要适当地做一些加法。2019年召开的物理化学教学研讨会上，山东大学张树永教授提出了在物理化学教学改革中引入内容的选择原则，建议重点引入新概念、新原理以及经典原理的创新应用<sup>[7]</sup>。例如化学热力学中的非平衡态热力学和化学动力学中的微观反应动力学等可以作简单的介绍。在2023年的物理化学教学研讨会上，杨学明院士指出对于化学反应过渡态的介绍，除了常见的势垒型，还应包括势阱型过渡态，这样既可以开阔知识面，又可以避免思维僵化。另外近年来光催化已逐渐成为催化领域中的热门研究方向，然而传统的物理化学教学内容中对于光催化过程过渡态理论的介绍明显不足，因此李全松等建议将势能面交叉的概念和相关理论引入物理化学的教学内容<sup>[8]</sup>，作为光催化理论研究领域的基础性知识。

物理化学的三大理论体系包括化学热力学、化学动力学和结构化学，但是由于课时数的限制，很多工科类专业往往只讲热力学和动力学部分，而略去了量子力学基础和统计热力学，并且也没有像理科化学专业一样单独开设一门结构化学，从而使学生无法建立微观结构与宏观性质之间的联系，这显然是不能适应当前计算机模拟和辅助设计越来越大行其道的化学与化工科研环境的。对微观体系的计算机模拟是智能化工延伸到微观尺度的基础，而统计热力学的桥梁作用又是建立微观尺度与介观乃至宏观多尺度耦合模型的一个关键环节。浙江大学彭笑刚的《物理化学讲义》采取的做法很有借鉴意义，即在对量子化学的必要知识作一个简单的介绍后，以统计热力学为桥梁，建立微观的分子图像与宏观热力学之间的联系，从而降低了与化学难以建立联系的经典热力学的比重，在学时数基本不变的情况下，使学生更容易从化学的微观本质上去理解热力学的基本概念和理论，以及由大量分子产生的宏观表象。笔者在近年的物理化学课程讲授中也借鉴了这一做法，将与《无机化学》上册内容有重复的部分改为自学，从而将原教学计划中总共14学时的经典热力学压缩至12学时，多出来的2学时用于简单介绍原本未列入教学计划的量子力学和统计热力学初步。事实上，早在1997年出版的由McQuarrie和Simon编写的教材*Physical Chemistry – A Molecular Approach*中就已经采用了这种编排，甚至在克劳修斯不等式的引出中，也没有沿用传统的方法采用经典物理中的卡诺定理，而是直接采用了统计解释。其依据的指导思想是“从宏观到微观是物理化学历史发展的真实面貌，但现代物理化学研究更多地聚焦于分子层面，以求对化学反应本质有更深入的理解<sup>[9]</sup>”。换言之，虽然历史上克劳修斯不等式的导出与卡诺定理相关，但这一逻辑关系对于理解和认识宏观热力学性质的微观本质并没有实质性的帮助。

## 2.2 教学手段的多样化

物理化学这门课的理论性和逻辑性很强，许多定理和概念都建立在理想化模型和假想假设的基础上，学生往往对此难以理解和接受。由于人类大脑结构和认知特点决定了人们更善于理解图像传达的含义，因此过去几十年来，物理化学教师都非常重视多媒体教学手段的运用。例如，通过将静态的文字内容，转化为生动形象的图像、动画、影像等动态内容，使学生通过感性的认知加深对物理化学基本概念和理论的理解，从而取得了更好的学习效果。

不同于以往的多媒体教学偏重概念和理论的具象化，在计算机软硬件技术迅速发展的今天，我们还可以在物理化学的教学中引入计算机模拟的手段，直接模拟物理或化学变化的现象及其微观过程，使学生直观清晰地了解整个变化的进程，建立宏观性质和微观结构之间的联系。如用Material Studio或Vesta软件构建多相催化剂的表面结构模型，用VASP或CP2K等软件模拟吸附分子的反应并预测过渡态结构和能量，最后用VMD等软件动态展示反应历程，从而让学生直观地“看到”分子的微观结构和化学反应进行的过程，增加学习的兴趣。得益于高性能计算机的普及，科学研究中使用的计算化学和分子模拟的手段已经完全可以应用在化学热力学和化学动力学的辅助教学中，以热力学为例，通过量子化学计算软件Gaussian、Orca或传统热力学计算软件HSC Chemistry等均可计算化合物的焓、熵、自由能以及反应过程中的热力学变化量，并且这些软件和计算方法也是目前科研领域流行的方法。笔者在热力学部分讲课过程中给学生布置了一道课外作业，即不限方法计算对苯二甲酸的热力学参数。在交上来的作业中，有的采用HSC Chemistry进行计算，有的用教材给出的公式结合自己熟悉的程序语言如Matlab、Python等编程计算，有的同学甚至为此专门自学了Gaussian量子化学计算，并将量子化学计算的结果与实验数据进行了对比分析(图3)。

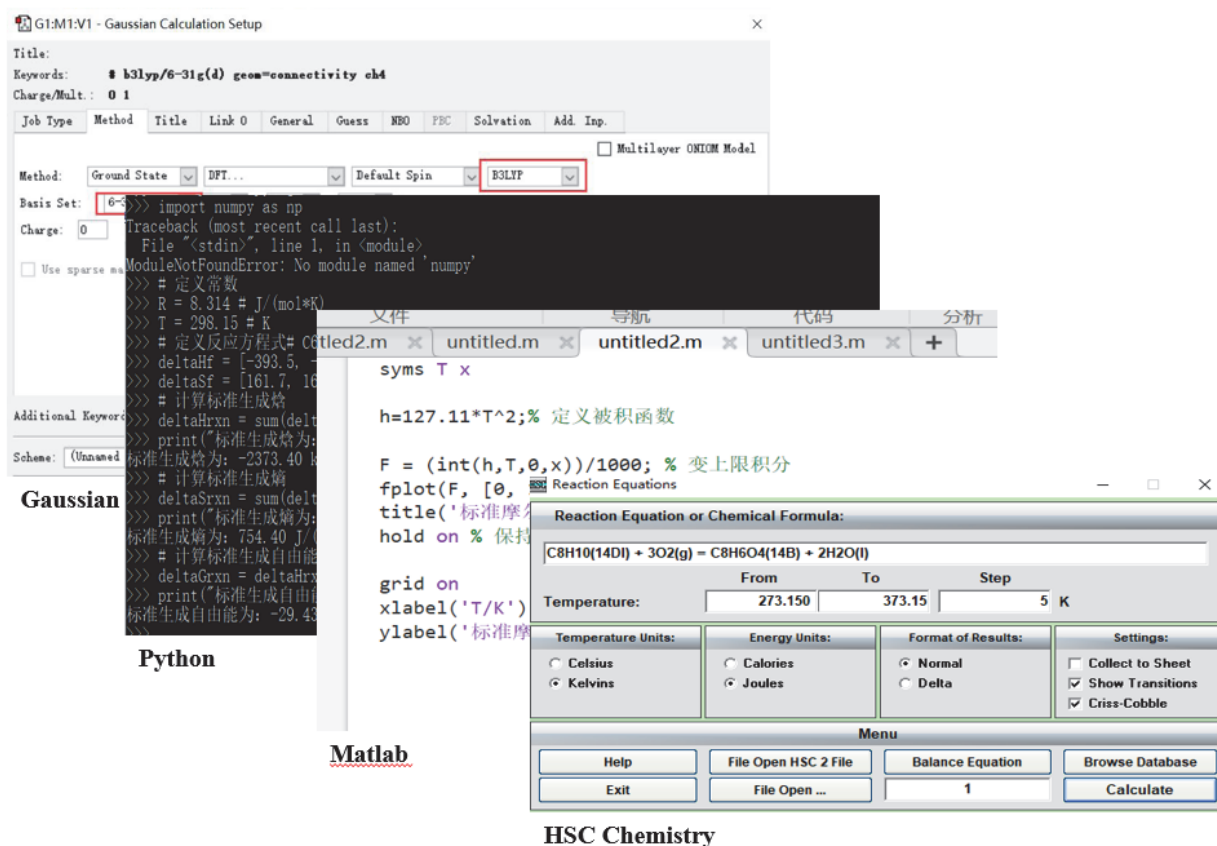


图3 采用不同的方法计算对苯二甲酸的热力学参数

另外，在化学动力学的教学过程中，也可以通过对表面吸附的模拟讲解物理吸附和化学吸附的异同，采用表面反应的模拟直观地介绍基元反应和反应通道，通过过渡态搜索介绍势能面和活化能等概念并计算反应速率常数等。以上内容还可以通过精选一个反应，在同一个体系中完成，实现知识体系的连贯性和完整性，整个体系介绍完了，学生也就自然可以在头脑中清晰地构建出一个化学反应或多相催化反应的微观反应历程。笔者在化学动力学章节的讲授过程中，用0.5学时简单介绍和演示了表面催化反应过程的计算机模拟(如图4所示)，引起了同学们极大的兴趣。

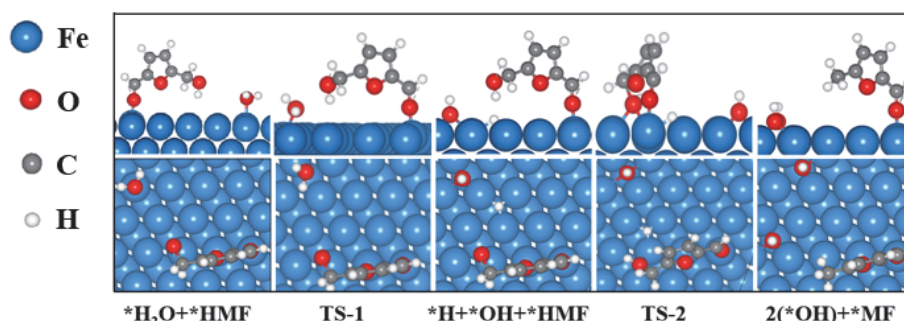


图4 计算机模拟直观展示Fe表面的5-羟甲基糠醛氢解反应微观反应历程<sup>[10]</sup>

HMF: 5-羟甲基糠醛; MF: 5-甲基糠醛; TS-1: 过渡态1; TS-2: 过渡态2

### 2.3 实验内容的现代化

传统的物理化学实验普遍注重对基础理论的验证，其中多数理论在19世纪已经成熟，而采用的实验仪器和方法也较为陈旧和简陋，难以与现代化学化工研究和应用相匹配，学生不能学以致用，使学生产生了物理化学用处不大的错觉。因此，因应“智能化工”发展的需要，物理化学实验也应在内容上进行适当的调整。在2023年的物理化学教学研讨会上，许新华教授在对比了中美两国物理化学实验的教学内容后提出了实验内容现代化的几个趋势，认为我们不能仅着眼于传统实验的改进和提高，更要注重新实验技术的运用、计算机模拟计算技术的引入和新教学实验课题的设计。

合肥工业大学化学与化工学院很早就注意到了这个问题，因此通过教学改革，不断引进新型实验设备、探索新的教学方法。如对于吸附实验，在保留了经典的溶液中亚甲基蓝吸附实验的同时，还引入了BET法氮气吸附实验测固体催化剂比表面积，并将其串联到多相催化剂制备与表征(程序升温还原、粉末X射线衍射等)的综合实验中，很好地实现了从物理化学的基础理论到科研应用的无缝衔接。未来还将融入更多的先进仪器和计算化学实验以进一步丰富实验内容。

计算机模拟技术的应用也是未来实验内容改革的一个重要趋势，随着近年来密度泛函理论计算软件和高性能计算机的快速发展，普通的家用台式机上也已经可以很直观地模拟微观反应过程了，因此可以在理论课中适当地介绍量子力学和统计热力学基础，同时在实验课中相应地开设分子模拟实验，可以极大地帮助学生从微观层面理解化学反应过程，初步掌握相关的计算方法，以适应智能化工中反应机理研究、新材料研发和多尺度耦合计算机模拟的需要。在2021年的物理化学教学研讨会上，复旦大学刘永梅教授介绍了在物理化学实验中，将微观尺度的计算机模拟和反应器尺度的虚拟仿真技术应用到甲醇选择性催化氧化反应中，在同一个教学实验中实现了多尺度模拟，使学生对于一个催化反应可以建立从微观到宏观的全面认知。

## 3 结语

经过数十年的建设和发展，我国高等学校物理化学的教学水平有了显著提升，特别是近年来现代教育技术的融入，提供了更高效更丰富的教学组织方式，使得教学手段更加灵活多样，教学活动也更加丰富多彩。然而，随着“工业4.0”的到来，以工业互联网和人工智能为代表的现代信息技术

为现代化工的发展带来了新的机遇，也为化工类专业人才培养提出了新的挑战。作为基础化学体系中一门核心课程，物理化学的教学必须以适应“智能化工”的发展要求为主旨，科研范式的变化带来的教学理念的更新可能是我们首先需要考虑的问题，以及由此带来的在实践层面上，不仅需要从教学内容上进行选择和优化，同时也要在教学方法和教学手段等方面不断地进行改革和创新。如同“智能化工”仍然处于发轫阶段一样，智能化工的课程体系建设也还处于探索阶段，需要每一位相关专业的教学工作者进行积极的思考、探索和交流。

#### 参 考 文 献

- [1] 韩玉. 橡塑资源利用, **2019**, No. 2, 25.
- [2] 吉旭, 党亚固, 周利, 戴一阳. 化工进展, **2020**, *39* (8), 2927.
- [3] Zhou, T.; Sundmacher, K. *Front. Chem. Sci. Eng.* **2022**, *2*, 137.
- [4] 齐妙. 机器学习方法在磷酸铝分子筛定向合成中的应用. 北京: 清华大学出版社, 2013.
- [5] 饶兴鹤. 中国石油和化工产业观察, **2021**, No. 7, 78.
- [6] 张玮, 王俊文, 程永强, 董晋湘. 中国大学教学, **2019**, No. (7-8), 75.
- [7] 张树永, 刁国旺, 侯文华. 大学化学, **2019**, *34* (11), 74.
- [8] 李全松, 李泽生. 大学化学, **2019**, *34* (4), 51.
- [9] 侯文华, 张树永. 大学化学, **2023**, *38* (6), 129.
- [10] Li, X.; Rui, P.; Ye, T. Q.; Yao, X.; Zhou, R. L.; Li, D. D.; Wang, S.; Carter, J. H.; Hutchings, G. J. *Catal. Sci. & Technol.* **2023**, *13*, 3366.